

Winmostar チュートリアル

Gromacs

基礎編

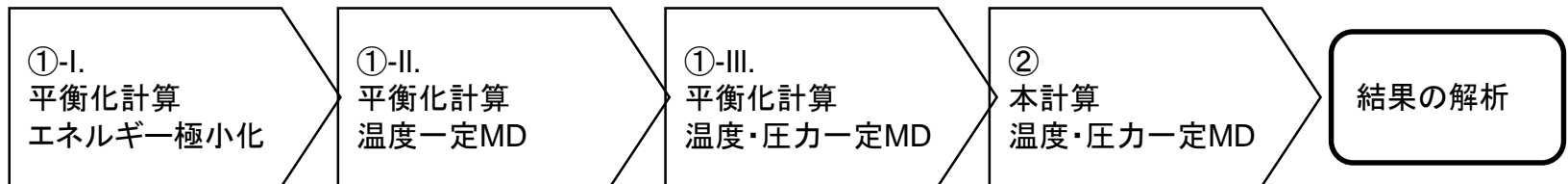
V8.000

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- 常温常圧の水について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、基礎的な結果解析を行います。



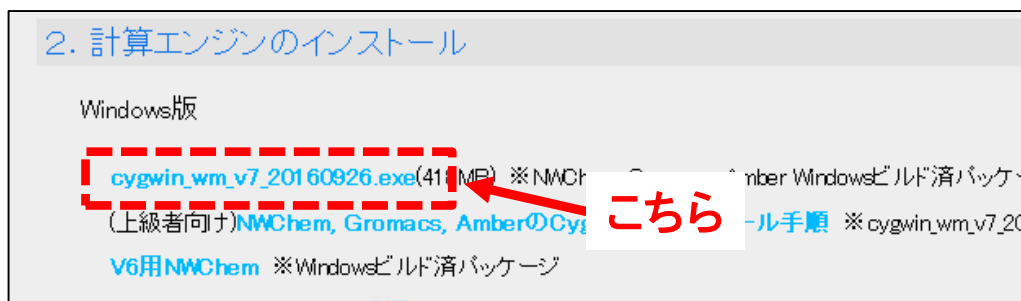
注意点:

- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は本例と異なる場合があります。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 相互作用計算方法や力場も計算結果に大きく影響します。

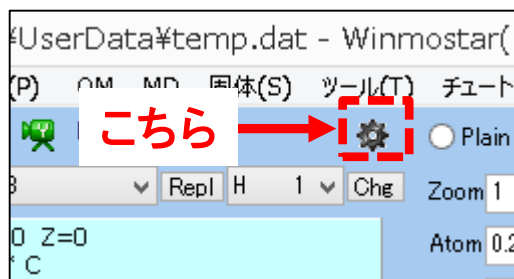
動作環境設定

本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- https://winmostar.com/jp/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。



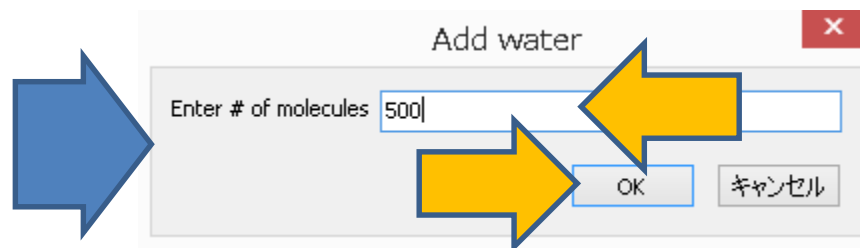
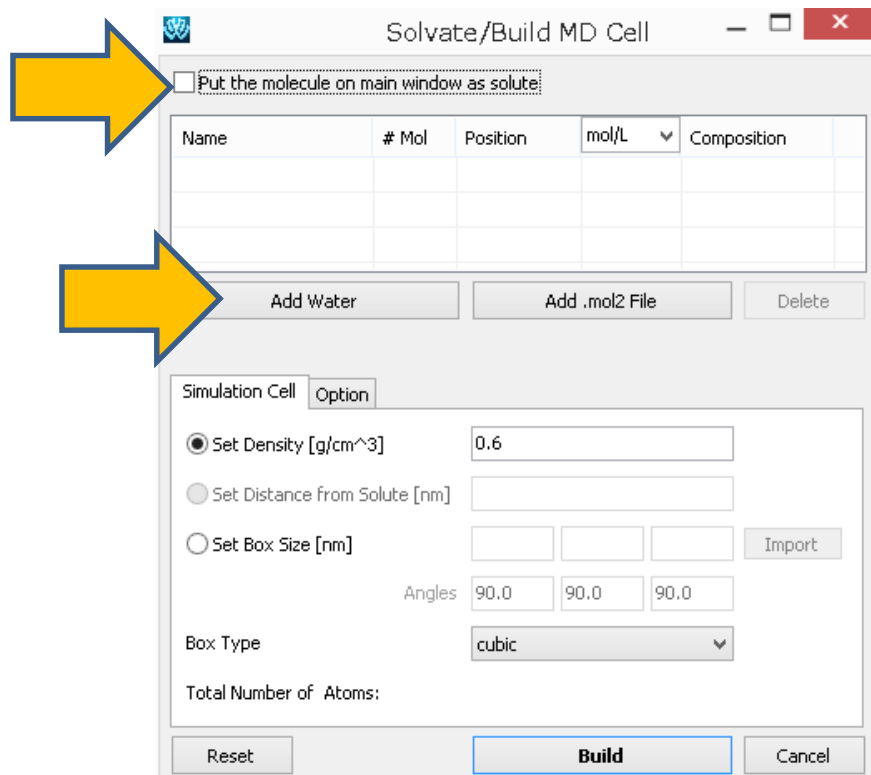
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 系の作成

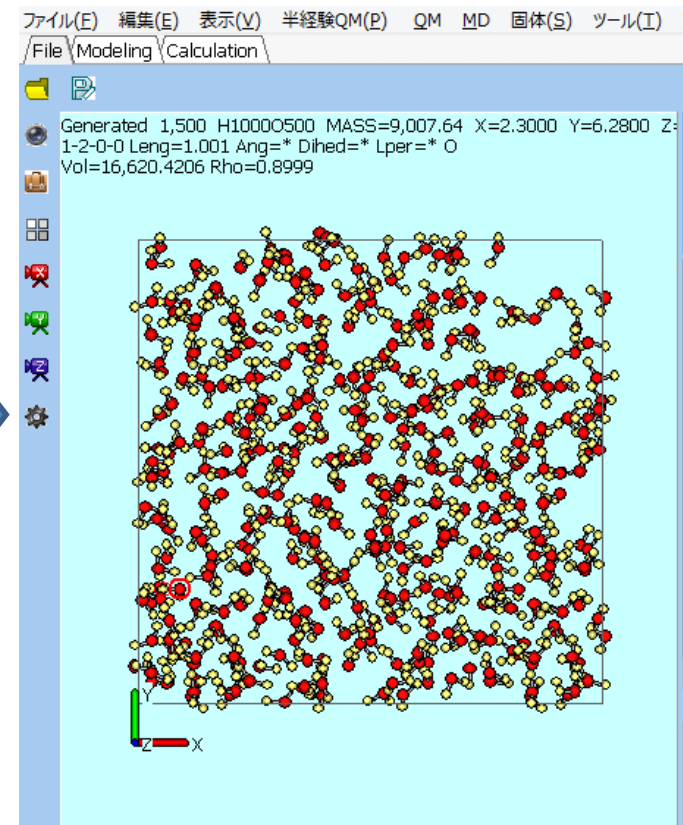
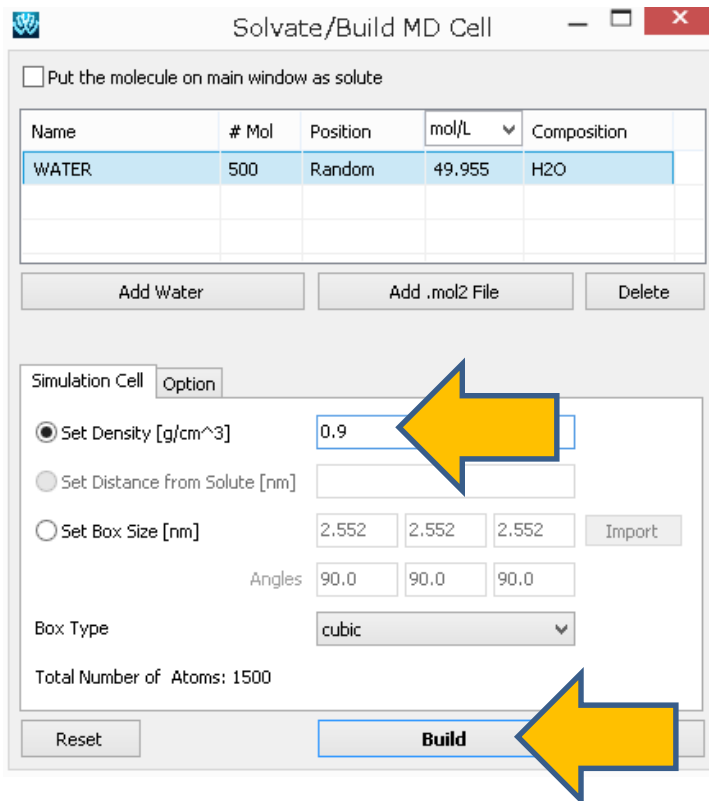
まず[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。

[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[Add water]ボタンをクリックする。[Enter # of molecules]に「500」と入力し[OK]をクリックする。



I. 系の作成

「Set Density」に「0.9」と入力し、「Build」をクリックすると左図のような系が作成される。



II. 平衡化(エネルギー極小化)

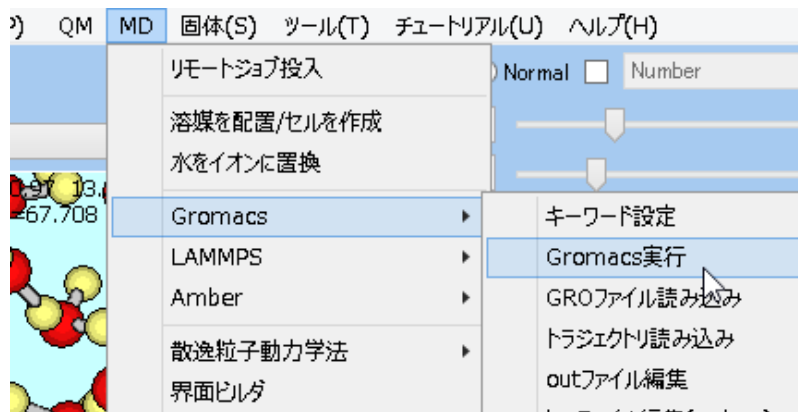
「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。Winmostar起動後キーワードが変更されている場合は「Reset」ボタンを押す。その後「OK」ボタンを押す。

The image shows the Winmostar interface with the 'MD' menu open. The 'Gromacs' option is selected, and its sub-menu is also open, showing 'キーワード設定' (Keyword Settings) as the active option. A blue arrow points from the 'MD' menu to the 'Gromacs' sub-menu, and a yellow arrow points from 'キーワード設定' to the 'Gromacs Setup' dialog box. The dialog box is titled 'Gromacs Setup' and contains several sections: 'Run Control' (dt [ps]: 0.002, nsteps: 5000, integrator: steep), 'Temperature Coupling' (tcoupl: berendsen, ref-t [K]: 300.0, tau-t [ps]: 1.0), 'Velocity Generation' (gen-vel: yes, gen-seed: 12345), 'Pressure Coupling' (pcoupl: no, ref-p [bar]: 1.0, tau-p [ps]: 1.0), and 'Constraints' (constraints: hbonds). At the bottom of the dialog, there are 'Reset', 'Save', and 'OK' buttons. A yellow arrow points from the 'Reset' button, and another yellow arrow points from the 'OK' button.

II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD > Gromacs > Gromacs実行」を選択する。座標ファイル(拡張子: gro)とトポロジーファイル(拡張子: top)の保存場所を聞かれるので、ファイル名を入力して保存する。

その後、Winmostar Job Managerが立ち上がり、Cygwin上でGromacsが実行される。



```

Step= 130, Dmax= 8.9e-03 nm, Epot= -2.38953e+04 Fmax= 3.46873e+03, atom= 2
Step= 131, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.39007e+04 Fmax= 4.15431e+03, atom= 2
Step= 132, Dmax= 1.3e-02 nm, Epot= -2.39035e+04 Fmax= 5.06342e+03, atom= 2
Step= 133, Dmax= 1.5e-02 nm, Epot= -2.39040e+04 Fmax= 5.87751e+03, atom= 2
Step= 135, Dmax= 9.2e-03 nm, Epot= -2.39461e+04 Fmax= 6.80578e+02, atom= 2
Step= 136, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.39480e+04 Fmax= 7.18043e+03, atom= 2
Step= 137, Dmax= 1.3e-02 nm, Epot= -2.40044e+04 Fmax= 2.40536e+03, atom= 2
Step= 139, Dmax= 8.0e-03 nm, Epot= -2.40103e+04 Fmax= 3.28001e+03, atom= 2
Step= 140, Dmax= 9.6e-03 nm, Epot= -2.40179e+04 Fmax= 3.63039e+03, atom= 2
Step= 141, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.40200e+04 Fmax= 4.58777e+03, atom= 2
Step= 142, Dmax= 1.4e-02 nm, Epot= -2.40224e+04 Fmax= 5.35575e+03, atom= 2
Step= 144, Dmax= 8.3e-03 nm, Epot= -2.40569e+04 Fmax= 5.75942e+02, atom= 2
Step= 145, Dmax= 9.9e-03 nm, Epot= -2.40689e+04 Fmax= 6.59339e+03, atom= 2
Step= 146, Dmax= 1.2e-02 nm, Epot= -2.41153e+04 Fmax= 1.96634e+03, atom= 2
Step= 148, Dmax= 7.1e-03 nm, Epot= -2.41202e+04 Fmax= 3.23036e+03, atom= 2
Step= 149, Dmax= 8.6e-03 nm, Epot= -2.41303e+04 Fmax= 2.91164e+03, atom= 2
Step= 151, Dmax= 5.1e-03 nm, Epot= -2.41441e+04 Fmax= 7.94787e+02, atom= 2
Step= 152, Dmax= 6.2e-03 nm, Epot= -2.41553e+04 Fmax= 3.58335e+03, atom= 2
Step= 153, Dmax= 7.4e-03 nm, Epot= -2.41719e+04 Fmax= 1.76375e+03, atom= 2
Step= 155, Dmax= 4.4e-03 nm, Epot= -2.41806e+04 Fmax= 1.42301e+03, atom= 2
Step= 156, Dmax= 5.3e-03 nm, Epot= -2.41880e+04 Fmax= 2.44535e+03, atom= 2
Step= 157, Dmax= 6.4e-03 nm, Epot= -2.41971e+04 Fmax= 2.14480e+03, atom= 2
Step= 158, Dmax= 7.7e-03 nm, Epot= -2.42006e+04 Fmax= 3.41770e+03, atom= 2
Step= 159, Dmax= 9.2e-03 nm, Epot= -2.42099e+04 Fmax= 3.18951e+03, atom= 2
Step= 161, Dmax= 5.5e-03 nm, Epot= -2.42250e+04 Fmax= 7.92476e+02, atom= 2
  
```

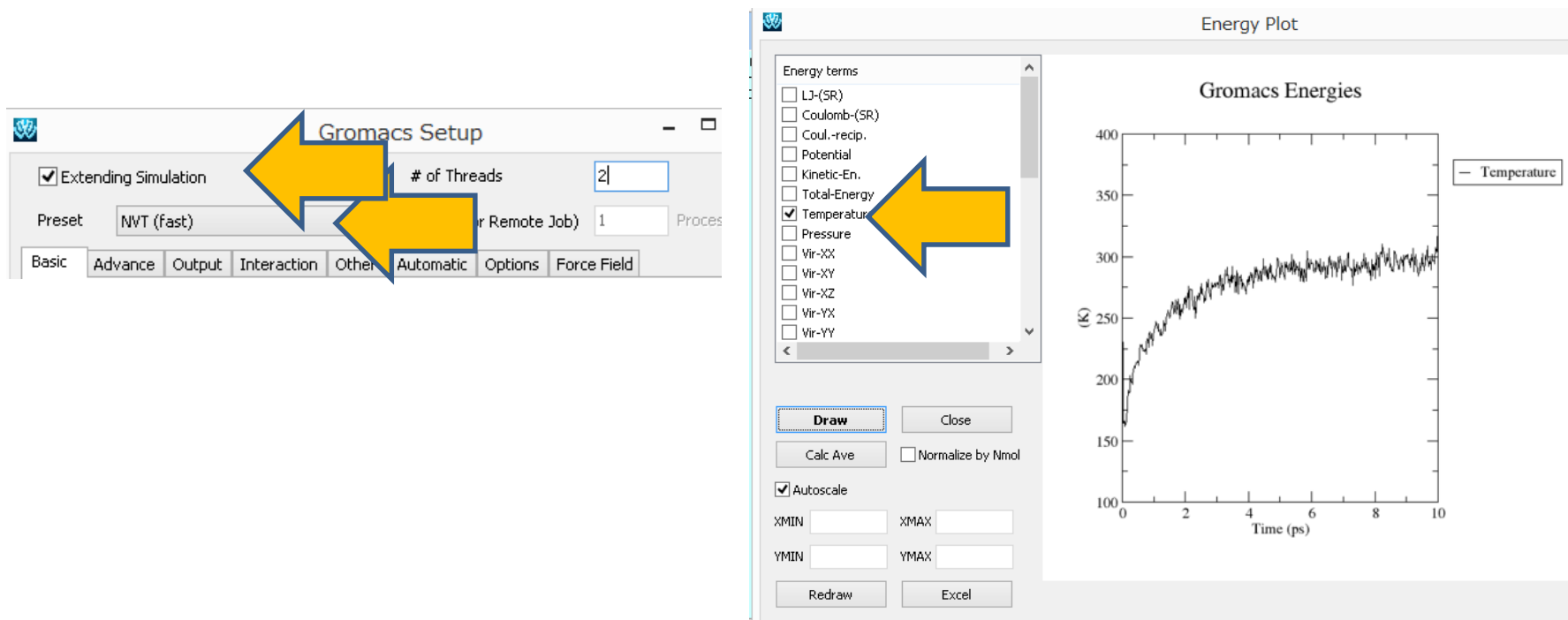
II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>Gromacs>エネルギー変化」を選択する。デフォルトで選択されるエネルギー(edr)ファイルを開く。「Energy Term」で「Potential」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押し、ポテンシャルエネルギーの変化を確認する。確認後「Close」ボタンを押す。

The screenshot displays the 'Energy Plot' window in X-Ability. On the left, a menu tree shows 'MD > Gromacs > エネルギー変化' selected. The 'Energy terms' list includes 'Potential' (checked), 'LJ-(SR)', 'Coulomb-(SR)', 'Coul.-recip.', 'Pressure', 'Vir-XX', 'Vir-XY', 'Vir-XZ', 'Vir-YY', 'Vir-YZ', 'Vir-ZX', and 'Vir-ZY'. The 'Draw' button is highlighted. The 'Gromacs Energies' plot shows potential energy (kJ/mol) on the y-axis (ranging from -30000 to 0) versus time (ps) on the x-axis (ranging from 0 to 200). The plot shows a sharp initial drop in energy followed by a gradual decrease towards a stable value around -25000 kJ/mol. A legend indicates the plotted line is 'Potential'.

II. 平衡化(温度一定)

「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し「OK」を押す。
その後、「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。
計算終了後「MD>Gromacs>エネルギー変化」にて「Temperature」を選択して「Draw」し、温度の変化を確認し「Close」する。



II. 平衡化(温度・圧力一定)

「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。「Preset」に「NPT (fast)」を指定し「OK」を押す。

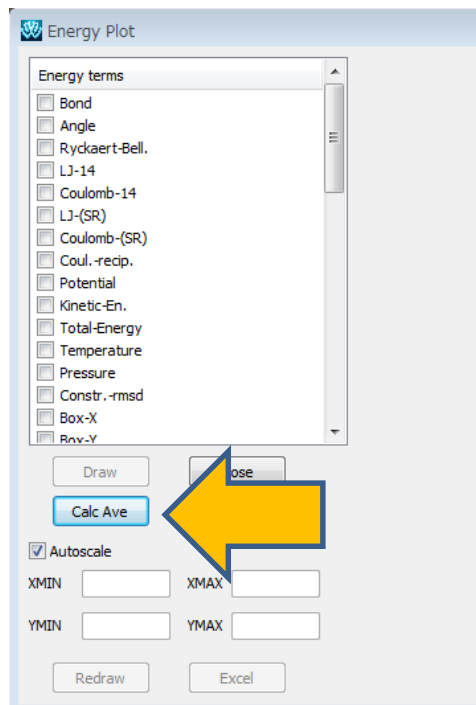
その後、「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。

計算終了後「MD>Gromacs>エネルギー変化」にて「Density」を選択して「Draw」し、密度の変化を確認し「Close」する。

The image displays two screenshots from the Gromacs software interface. The left screenshot shows the 'Gromacs Setup' dialog box with the 'Preset' dropdown menu set to 'NPT (fast)'. A yellow arrow points to this dropdown. The right screenshot shows the 'Energy Plot' window with the 'Density' checkbox selected in the 'Energy terms' list. A yellow arrow points to this checkbox. To the right of the Energy Plot window is a line graph titled 'Gromacs Energies' showing 'Density (kg/m³)' on the y-axis (ranging from 900 to 1100) and 'Time (ps)' on the x-axis (ranging from 0 to 10). The graph shows a fluctuating line representing the density over time, with a legend indicating the line represents 'Density'.

III. 本計算

同じキーワードのまま「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。
 計算終了後「MD>Gromacs>エネルギー変化」にて「Calc Ave」ボタンをクリックし、
 デフォルトで選択される座標ファイルを選択すると各種統計量の平均が表示される。



energy_ave.log.dos - メモ帳

ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

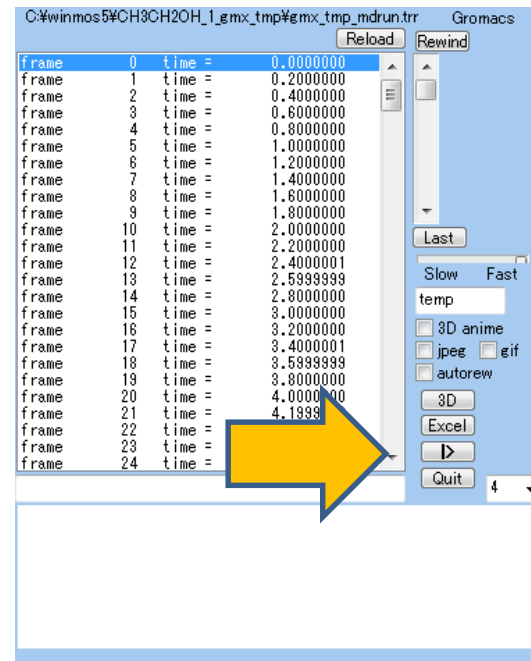
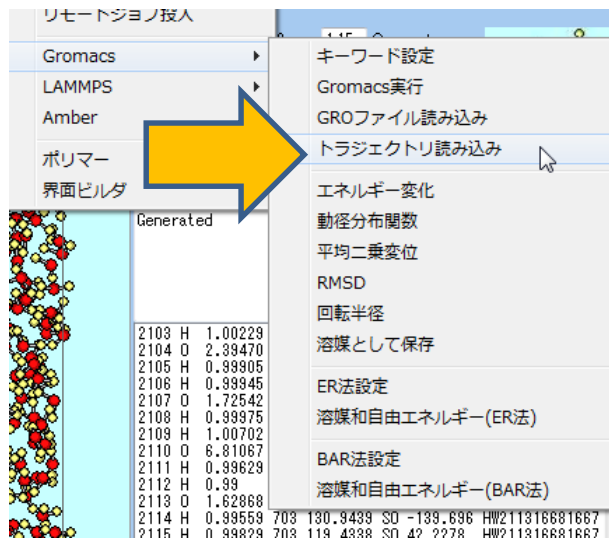
Statistics over 25001 steps [10.0000 through 60.0000 ps], 45 data sets
 All statistics are over 2501 points

Energy	Average	Err.Est.	RMSD	Tot-Drift	
Bond	0.00551545	0.0006	0.00536622	0.000221711	(kJ/mol)
Angle	0.0272785	0.0023	0.0105787	-0.00014163	(kJ/mol)
Proper Dih.	0.0127279	0.00026	0.00416163	0.00053524	(kJ/mol)
LJ-14	0.0022082	4e-05	0.00185213	-3.03403e-05	(kJ/mol)
Coulomb-14	-0.0755454	0.00096	0.00478958	-0.000339902	(kJ/mol)
LJ (SR)	9.08763	0.01	0.31616	-0.0579286	(kJ/mol)
Coulomb (SR)	-55.5543	0.026	0.3987	0.0610958	(kJ/mol)
Coul. recip.	0.239198	0.00076	0.019252	-0.00155659	(kJ/mol)
Potential	-46.2553	0.024	0.184407	0.00185575	(kJ/mol)
Kinetic En.	7.52638	0.0089	0.161975	-0.0349106	(kJ/mol)
Total Energy	-38.7289	0.029	0.0937769	-0.033055	(kJ/mol)
Temperature	300.565	0.35	6.46844	-1.39415	(K)
Pressure	0.858068	2.8	589.921	-5.75558	(bar)
Constr. rmsd	2.41314e-06	2.3e-07	1.60645e-06	-6.07153e-08	()
Box-X	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Box-Y	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Box-Z	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Volume	15.5509	0.027	0.153305	-0.160645	(nm ³)
Density	989.948	1.7	9.76797	10.1904	(kg/m ³)
pV	0.936499	0.0016	0.00923226	-0.00967426	(kJ/mol)
Enthalpy	-19867	15	48.1116	-16.9669	(kJ/mol)
Vir-XX	1283.74	11	392.512	46.7655	(kJ/mol)

IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

- 「MD>Gromacs>トラジェクトリ読み込み」を選択する。対象となる座標ファイル（拡張子: gro）とトラジェクトリファイル（拡張子: trr）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- アニメーション操作ウィンドウ（右図）が開く。再生ボタンを押すとアニメーションが表示される。



IV. 結果の解析

② 動径分布関数

- 「MD>Gromacs>動径分布関数」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル（拡張子: trr）、入力ファイル（拡張子: tpr）、インデックスファイル（拡張子: ndx）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Definition」に「Center of Mass」を選択し「Draw」を押すと動径分布関数が表示される。

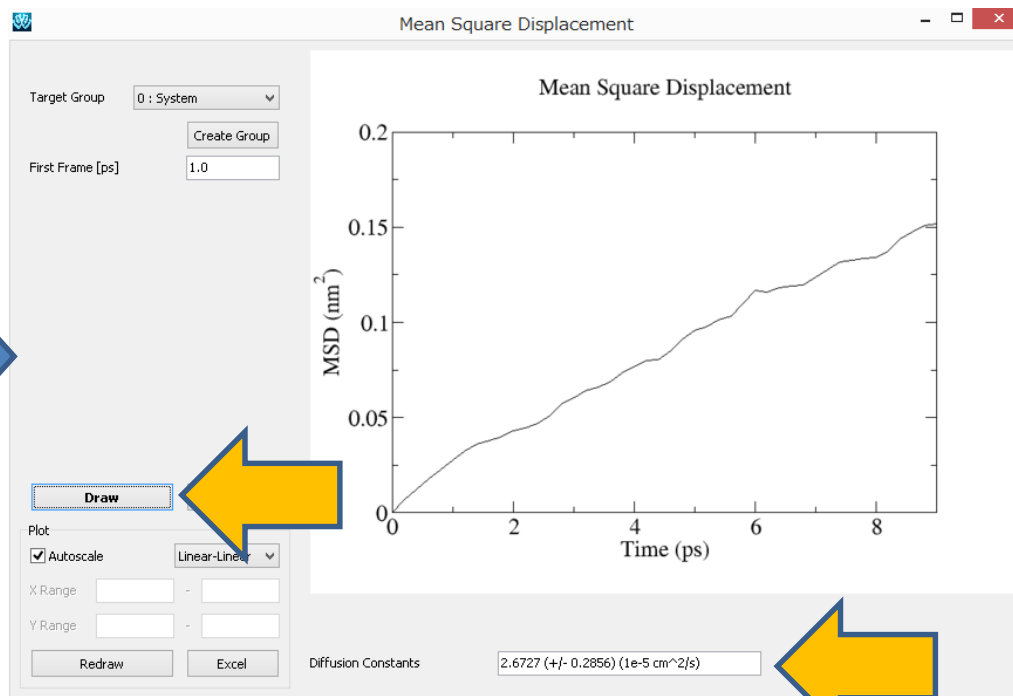
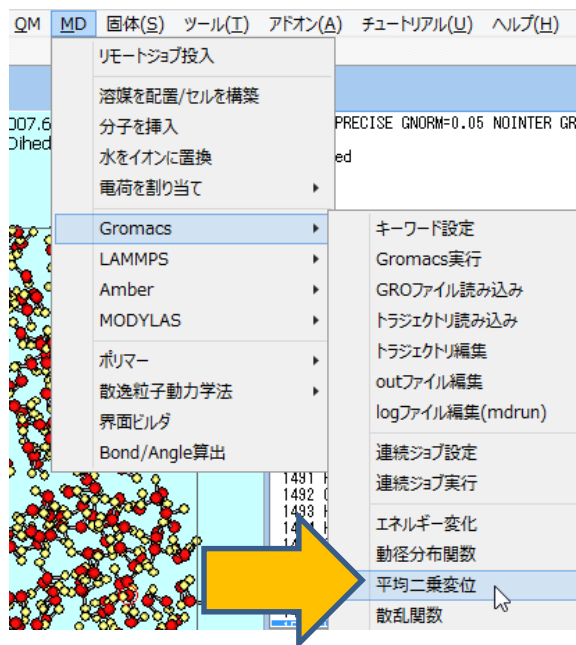
The image shows a sequence of three screenshots illustrating the process of calculating the Radial Distribution Function (RDF) in X-Ability.

- Left Screenshot:** The main application window with the 'MD' menu open. The 'Gromacs' sub-menu is selected, and the '動径分布関数' (Radial Distribution Function) option is highlighted. A yellow arrow points to this option.
- Middle Screenshot:** The 'Radial Distribution Function' dialog box. The 'Definition' dropdown is set to 'Center of Mass'. The 'Draw' button is highlighted with a blue arrow.
- Right Screenshot:** The resulting plot titled 'Radial distribution of molecule COM System - System'. The y-axis represents the RDF value (0 to 4) and the x-axis represents the distance r (0 to 2). The plot shows a sharp peak at approximately $r = 0.2$ and a smaller peak at $r = 0.5$.

IV. 結果の解析

③自己拡散係数

- 「MD>Gromacs>平均二乗変位」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル（拡張子: trr）、入力ファイル（拡張子: tpr）、インデックスファイル（拡張子: ndx）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Draw」ボタンを押すと平均二乗変位のグラフが表示され、その下に自己拡散係数が表示される。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!